

ДИНАМИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ОБРАЗОВАНИЯ СОСУЩЕСТВУЮЩИХ АУСТЕНИТНО-МАРТЕНСИТНЫХ ФАЗ

Э.Л. Аэро*, А.Л. Корженевский, А.Н. Булыгин

Институт проблем машиноведения Российской академии наук,

Большой пр. 61, В.О., Санкт-Петербург, 199178, Россия

*e-mail: 16aero@mail.ru

Аннотация. В рамках нового подхода для описания мартенситных превращений развита существенно нелинейная теория формирования двумерных микроструктур при большом сдвиге, когда наряду с акустической возбуждается и псевдооптическая мода. Для аналитического описания таких структур в плотности энергии наряду с континуальными градиентными членами учитывается и периодический член, ответственный за дискретные межатомные силы. Получены точные решения соответствующих динамических уравнений в предположении, что рост пластин мартенситной фазы происходит с постоянной скоростью.

1. Введение

В настоящее время большое внимание исследователей привлекает проблема структурных превращений и связанных с ними дефектов структуры и повреждений в поле интенсивных пластических деформаций. Ранние попытки ее решения путем введения внутренних степеней свободы в модели сложной решетки показали, что в пределах линейной теории действительно предсказываются некоторые новые эффекты. Однако в целом этот подход оказался неэффективным. Малые изменения внутренней структуры просто отслеживают изменения макроскопической геометрии решетки и приводят лишь к перенормировке материальных констант - модель сложной структуры сводится фактически к модели простой структуры. Основные новые результаты - появление новых мод оптических колебаний, пространственно-временная дисперсия упругих свойств и приграничные эффекты в статике. Кардинальные же структурные перестройки оказываются за пределами линейного подхода. Соответственно, остается невозможным и исследование динамики таких перестроек.

Цель настоящей работы состоит в анализе условий образования дефектов в изначально идеальной решетке и их динамики при фазовых превращениях мартенситного типа.

Мартенситные превращения (МП) долгое время были предметом изучения металлургов. Ими был накоплен огромный экспериментальный материал, обнаружен ряд интересных особенностей этих превращений, а также выработана специфическая терминология [6]. В теоретическом плане наиболее значительные результаты были получены в рамках кристалло-геометрического подхода [7]. Начиная с 70-х годов, было сделано множество попыток включить МП в общую схему фазовых переходов 1-го рода в рамках теории Ландау. При этом в качестве параметра порядка вводился определенный набор компонент тензора деформаций, а для однородного вклада в свободную энергию использовалось стандартное разложение по его степенным

инвариантам [8]. Так как в рамках континуальной бездефектной модели оценка активационного барьера зародыша дает величину порядка 10^5 К, то предполагалось, что зарождение мартенситной фазы происходит на дефектах аустенитной матрицы. В случае чистого кристалла под такими дефектами обычно подразумевались дислокации, а для сплавов – локальные флуктуации примесного состава. Взаимодействие возникающих зародышей учитывалось введением дальнедействующего анизотропного упругого потенциала в неоднородный вклад свободной энергии. Тем самым МП фактически отождествлялись с фазовыми переходами в дефектных сегнетоэластиках. Компьютерные расчеты для таких моделей дают картины структур, качественно похожие на электронно-микроскопические снимки зарождающейся мартенситной фазы, а также воспроизводят некоторые черты динамики МП [9]. В сегнетоэластиках, однако, переходы обусловлены смягчением акустической фононной моды, в то время как при МП небольшое смягчение наблюдается лишь в редких случаях. Кроме того, детальные эксперименты показывают, что зарождение мартенсита в матрице лишь отчасти коррелирует с дислокационной структурой. Ряд важных экспериментальных особенностей МП остается необъяснимым в рамках модели «грязных» сегнетоэластиков. В частности, остается неясным, почему возникновению мартенситной фазы часто предшествует появление сверхструктурных рефлексов, наблюдающихся в экспериментах по рассеянию электронов, рентгеновских лучей и нейтронов [10-13]. Поэтому создается впечатление, что какие-то существенные физические факторы в «сегнетоэластическом» подходе не учтены.

В настоящей работе мы анализируем динамику дефектов в предложенной нами новой модели МП [14, 15]. Для нее найдены точные двумерные решения нелинейных уравнений движения для полей макроскопических и микроскопических (межатомных) смещений в сложной решетке. Впервые показано, что ряд наблюдаемых сингулярных дефектов, действительно может зарождаться в первоначально идеальной решетке в поле постоянных напряжений, превышающих критические. Нами рассчитаны поля микросмещений атомов для дефектов, движущихся с постоянной скоростью.

Новизна нашего модельного гамильтониана основана на следующем общем аргументе. По определению, к МП относят бездиффузионные переходы с большой сдвиговой деформацией [16]. В кристаллах с более чем одним атомом на элементарную ячейку (т.е. в подавляющем большинстве случаев) атомы внутри ячейки при больших сдвиговых деформациях испытывают скачкообразные смещения на расстояния порядка размера ячейки. Ситуация может быть проиллюстрирована схематичным рисунком 1.

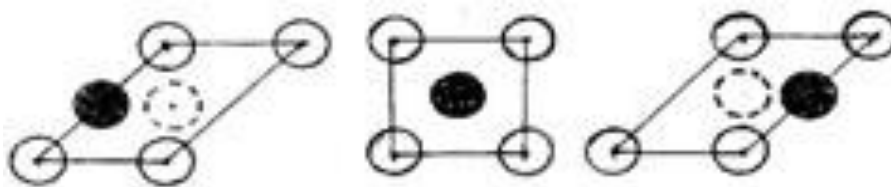


Рис. 1. Сложная кристаллическая решетка, состоящая из двух подрешеток: бифуркация структуры элементарной ячейки в ходе микродеформации.

Очевидно, что при критической величине сдвига, когда диагональ 13 становится меньше длины ребра ячейки 12, центральный атом скачком «выжимается» на боковую грань 23. Разумеется, чтобы описать соответствующее превращение количественно, надо знать атомные потенциалы взаимодействия, которые зависят от конкретного состава кристалла. Для структурных превращений, сопровождающихся малыми смещениями атомов, задача, как известно, сводится к вычислению фононного спектра и отбору смягчающихся ангармонизмом фононных мод [17]. Для МП атомные смещения

не малы, и их разложение по фоновым модам становится неадекватным. Как же записать гамильтониан для модели МП, одновременно достаточно простой для выполнения аналитических вычислений и вместе с тем учитывающий факт больших смещений подрешеток? Мы предполагаем, что в «минимальной» универсальной модели достаточно учесть трансляционную периодичность потенциала смещений подрешеток ограничившись его первой гармоникой, а также включить взаимодействие градиентов смещения подрешеток (микродеформаций) с упругими деформациями. В следующей главе эта модель описана более подробно и выведены определяющие соотношения для нее.

2. Основные соотношения. Учет взаимодействия мод деформаций

Будем для простоты рассматривать случай двух подрешеток, которые совмещаются (сливаются в одну или переходят из начального варианта в симметрично эквивалентный, например, сводящийся к общему повороту решетки) сдвигом на постоянный структурный вектор \vec{a} , являющийся параметром сложной решетки. Тогда в линейной теории кристаллической решетки [1, 2] получаются два уравнения - для акустических и оптических мод соответственно, для полей макроскопических и микроскопических смещений $U_i(x, y, t)$, $u_i(x, y, t)$. Первое описывает смещения центров кристаллических ячеек - элементов массы, как и в классической теории сплошной среды. Второе описывает взаимные смещения атомов внутри ячейки отвечает за изменение ближнего порядка в сложной решетке.

Мы получим нелинейные уравнения равновесия, варьируя функционал энергии для заданной области (В,Н), который определен следующим образом

$$E = (1/8\rho BH) \int_0^B \int_0^H \epsilon dx dy, \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} e = & (1/2)\lambda_{ikjm} U_{i,k} U_{j,m} + (1/2)k_{ikmn} u_{i,k} u_{m,n} + C_{ikjm} U_{i,k} u_{j,m} + p(1 - \cos u) = \\ & = (1/2)\lambda_{ikjm}^{-1} \sigma_{ik} \sigma_{jm} + (1/2)\hat{k}_{ikmn} u_{i,k} u_{m,n} + p(1 - \cos u). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь $u = \sqrt{(u_n a_{nm} u_m)}$, где a_{nm} - тензор обратных длин ячейки. Далее, $U_{i,k}$, $u_{i,k}$ - пространственные производные, обозначенные запятой в тензорных индексах. Круглые скобки в тензорах материальных констант означают симметрию по заключенным в них индексам, то есть

$$\lambda_{(ik)(jm)} = \lambda_{(ki)(mj)}, \quad C_{(ik)(jm)} = C_{(ki)(mj)}, \quad k_{(ik)(jm)} = k_{(ki)(mj)}, \quad \hat{k}_{(ik)(jm)} = \hat{k}_{(ki)(mj)}.$$

Избегая загромождения формул, будем далее подразумевать эти обозначения с применением скобок в индексах.

Первое слагаемое в (2.2) представляет собой упругую энергию деформирования, а последнее, содержащее периодическую функцию микросмещений, представляет энергию взаимодействия подрешеток инвариантную к их жесткому смещению на соответствующий период. Перекрестное слагаемое с коэффициентом C_{ikjm} отвечает за принципиально важное взаимодействие поля деформаций с микроскопическим полем внутренней степени свободы (отвечающей внутриячеечной перестройке атомной конфигурации). Обоснуем наш выбор его формы в (2.2).

Возможные виды стрикционного взаимодействия внутренних степеней свободы (параметров порядка) с полем деформаций изучались при анализе упругих, электро- и магнитоэлектрических свойств, которые особенно ярко проявляются в материалах,

испытывающих фазовые переходы. При этом в основу рассмотрения были положены симметричные свойства параметров порядка. В частности, было установлено, что если элементы (ячейки) среды не обладают центром инверсии, (как, например, в пьезоэлектриках), то главный вклад в стрикционное взаимодействие линейен как по компонентам параметра порядка, так и по деформациям. Он имеет вид $d_{i,kl}u_iU_{k,l}$. В центросимметричных средах такого вклада нет, и стрикционное взаимодействие квадратично по компонентам параметра порядка и линейно по деформациям, т.е. записывается как $q_{i,klm}u_iu_kU_{l,m}$. Эта форма является наиболее универсальной и присутствует в описании любых фазовых состояний [18]. Однако следует иметь в виду, что обычно рассматриваются однородные низкоэнергетические состояния твердых тел, в то время как мы интересуемся описанием высокоэнергетических состояний, появление которых происходит под действием больших нагрузок и сопровождается возникновением сверхструктур различных масштабов. Очевидно, что при этом возрастает роль стрикционных инвариантов взаимодействия, содержащих градиенты внутренних степеней свободы. Более того, при достаточно малых масштабах сверхструктур именно эти градиентные члены будут давать главный вклад в стрикционное взаимодействие. В этом легко убедиться, сравнив градиентные вклады $C_{i,klm}u_iu_kU_{l,m}$ с универсальными $q_{i,klm}u_iu_kU_{l,m}$. Ясно, что для мелкомасштабных наноструктур градиентный вклад становится доминирующим. Соответственно, в плотность энергии (1.2) включен именно этот вклад, а вклады типа $q_{i,kl}u_iU_{k,l}$ и $q_{i,klm}u_iu_kU_{l,m}$ опущены как малые.

Второе равенство в (2.2) получается простой перегруппировкой слагаемых в результате введения обозначений

$$\sigma_{ik} = \lambda_{ikmn}U_{m,n} - C_{ikmn}u_{m,n}, \quad (2.3)$$

$$\hat{k}_{pqrs} = k_{pqrs} - C_{ikrs}\lambda_{ikmn}^{-1}C_{mnpq}. \quad (2.4)$$

Переход к новым переменным - напряжениям σ_{ik} , а также $u_{x,xy} \ll u_{y,xx}$, $u_{x,xy}$, $u_{i,k}$ и u_i позволяет упростить описание по этим переменным - функционал формально не содержит перекрестных слагаемых. Это упрощает и форму записи уравнений равновесия. Так, варьируя вначале функционал (2.1) по $U_{i,k}$, $u_{i,k}$, u_i и используя затем обозначения (2.3), (2.4) получим систему уравнений равновесия в удобной для дальнейшего анализа форме

$$\rho \ddot{U}_i = \sigma_{ik,k}, \quad (2.5)$$

$$\mu \ddot{u}_i = \hat{k}_{ikjm}u_{k,jm} - pl_i \sin u - C_{nmik}\lambda_{rsmn}^{-1}\sigma_{rs,k}, \quad l_i = u_i/u, \quad u = \sqrt{(u_n a_{nm} u_m)}. \quad (2.6)$$

3. Двухкомпонентный и двумерный вариант теории.

Проанализируем, как и в предыдущей публикации [19], двумерную задачу, но динамическую. Рассмотрим приближенное решение системы (2.5), (2.6), когда выполняется соотношение для малых поперечных смещений

$$u_x \ll u_y, \quad U_x \ll U_y. \quad (3.1)$$

Вначале ограничимся анализом решений пары уравнений

$$\rho \ddot{U}_x = \sigma_{xx,x} + \sigma_{x,yy}, \quad \mu \ddot{u}_x = -p_1 \sin u_x + \bar{k} \mu_{x,xx} + \bar{k} \mu_{x,yy} + \bar{k} \mu_{y,yx} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}. \quad (3.2)$$

Далее будут проанализированы решения более сложных уравнений

$$\rho \ddot{U}_y = \sigma_{yx,x} + \sigma_{y,yy}, \quad \mu \ddot{u}_y = -p_2 \sin u_y + \hat{k}_1 \mu_{y,yy} + \hat{k}_{23} \mu_{x,xy} + \hat{k}_3 \mu_{y,yx} + (s_3 \sigma_{xx} + s_4 \sigma_{yy})_{,y}. \quad (3.3)$$

Режим подвижки подрешеток при выполнении условия (3.1) отвечает случаю распространения мартенситных пластин вдоль оси OY . Ясно, что при этом поле u_y плавно меняется вдоль оси OY , а поле u_x имеет большие градиенты в поперечном направлении. Будем считать, что условие (3.1) позволяет линеаризовать уравнение (3.2), заменив синус линейным слагаемым. Тогда вместо второго уравнения (3.2) получим уравнение

$$p_1 u_x = \bar{k} \mu_{x,xx} + \bar{k} \mu_{x,yy} + \bar{k} \mu_{y,yx} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}, \quad (3.4)$$

В дальнейшем опустим и линейный член в левой части, приняв окончательно

$$0 = \bar{k} \mu_{x,xx} + \bar{k} \mu_{x,yy} + \bar{k} \mu_{y,yx} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy})_{,x}, \quad (3.5)$$

В соответствии с условием (3.1) в нем второе слагаемое справа также можно опустить. В результате получим уравнение, которое легко интегрируется по x , что даёт уравнение более низкого порядка

$$\bar{k} \mu_{x,x} + \bar{k} \mu_{y,y} + (s_1 \sigma_{xx} + s_2 \sigma_{yy}) = b(y). \quad (3.6)$$

Здесь $b(y)$ – произвольная функция.

Выразим стандартным образом напряжения в (3.6) через производные $U_{x,x}$, $U_{y,y}$, $u_{x,x}$, $u_{y,y}$:

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \lambda_1 U_{x,x} + (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{y,y} + c_1 u_{x,x} + (c_{12} - c_2) u_{y,y}, \quad \sigma_{yy} = (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{x,x} + \lambda_1 U_{y,y} + (c_{12} - c_2) u_{x,x} + c_1 u_{y,y} \\ \sigma_{xy} &= \lambda_2 (U_{x,y} + U_{y,x}) + c_2 (u_{x,y} + u_{y,x}). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Это даёт вместо (3.6) соотношение между микро и макродеформациями

$$(\bar{k}_1 + S_2 C_1) u_{x,x} + [\bar{k}_{23} + S_2 (C_{12} - C_2)] u_{y,y} + s_1 \lambda_1 U_{x,x} + S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) U_{y,y} = b(y). \quad (3.8)$$

Получим ещё одно соотношение между ними. Оно следует из закона сохранения x – компоненты импульса

$$0 = \sigma_{y,xx} + \sigma_{y,yy} \rightarrow 0 = \lambda_1 U_{x,xx} + \lambda_{12} U_{y,yx} + C_1 u_{x,xx} + C_{12} u_{y,xy}. \quad (3.9)$$

В нём опущены малые слагаемые $U_{x,yy}$, $u_{x,yy}$. После интегрирования (3.9) по x получим

$$\lambda_1 U_{x,x} + \lambda_{12} U_{y,y} + C_1 u_{x,x} + C_{12} u_{y,y} = a(y). \quad (3.10)$$

Уравнения (3.8), (3.10) можно разделить относительно градиентов $U_{x,x}$, $U_{y,y}$, что даёт

$$\begin{aligned} \lambda_1 [S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) - S_1 \lambda_{12}] U_{x,x} + [C_1 S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12} (k_1 + S_2 C_1)] u_{x,x} \\ + \{C_{12} S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) - \lambda_{12} [\bar{k}_{23} + S_2 (C_{12} - C_2)]\} u_{y,y} = S_2 (\lambda_{12} - \lambda_2) a(y) - \lambda_{12} b(y), \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$[S_1\lambda_{12} - S_2(\lambda_{12} - \lambda_2)]U_{y,y} + [C_{12}S_1 - \bar{k}_{23} - S_2(C_{12} - C_2)]u_{y,y} + (S_1C_1 - S_2C_1 - \bar{k}_1)u_{x,x} = S_1a(y) - b(y). \quad (3.12)$$

Обратимся теперь к анализу второй пары уравнений (3.3). Первое из них (закон сохранения y – компоненты импульса) имеет вид, если раскрыть в нём выражения для напряжений

$$\rho\ddot{U}_y = \sigma_{y,xx} + \sigma_{y,yy} \rightarrow \rho\ddot{U}_y = \lambda_2 U_{y,xx} + \lambda_1 U_{y,yy} + \lambda_{12} U_{x,xy} + C_2 u_{y,xx} + C_{12} u_{x,xy} + C_1 u_{y,yy}. \quad (3.13)$$

Заменим здесь сумму $\lambda_{12} U_{x,xy} + C_{12} u_{x,xy}$, используя соотношения (3.8) и (3.10). В результате получим уравнение (3.13) в виде

$$\rho\ddot{U}_y = \lambda_2 U_{y,xx} + \Lambda U_{y,yy} + C_{11} u_{y,yy} + C_2 u_{y,xx} + A(y). \quad (3.14)$$

Здесь $A(y)$ – произвольная функция («константа» интегрирования). Решением же уравнения (3.14) займёмся позже.

Теперь перейдем к анализу второго уравнения (3.3), которое может быть записано следующим образом после раскрытия в нём напряжений

$$\mu \ddot{u}_y + p_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + [\hat{k}_1 + S_3(C_{12} - C_2) + S_4 C_1] u_{y,yy} + \hat{k}_{23} u_{x,xy} + [S_4 \lambda_1 + S_3(\lambda_{12} - \lambda_2)] U_{y,yy} + [S_3 C_1 + C_4(C_{12} - C_2)] u_{x,xy} + [S_3 \lambda_1 + S_4(\lambda_{12} - \lambda_2)] U_{x,xy}. \quad (3.15)$$

Его интегрирование становится возможным, если, заменив производную $u_{x,xy}$, исключить из этого уравнения производные $U_{x,x}$, $U_{y,y}$ с помощью соотношений (3.11) и (3.12). Уравнение (3.15) тогда переписывается так

$$\mu \ddot{u}_y + p_2 \sin u_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + K_1 u_{y,yy} + K_2 u_{x,xy}, \quad (3.16)$$

Новые коэффициенты \bar{k}_3 , K_1 , K_2 оказываются весьма громоздкими функциями лишь коэффициентов уравнений (3.2-3.15). Вместе с (3.8), (3.10), (3.14) получили в окончательном виде полную систему уравнений. Решением уравнения (3.16) займёмся позднее.

4. Стационарные волны. Некоторые частные решения $u_y(x, y, t)$, $u_x(x, y, t)$

Дальнейшее продвижение с уравнениями (3.14), (3.16) в общей форме затруднительно. Последнее слагаемое требует нахождения двух пар функций $U_x(x, y, t)$, $u_x(x, y, t)$, $U_y(x, y, t)$, $u_y(x, y, t)$. Сначала проведем анализ уравнений

$$\rho\ddot{U}_y = \lambda_2 U_{y,xx} + \Lambda U_{y,yy} + C_{11} u_{y,yy} + C_2 u_{y,xx} + A(y), \quad (4.1)$$

$$\mu \ddot{u}_y = \bar{k}_3 u_{y,xx} + K_1 u_{y,yy} - p_2 \sin u_y. \quad (4.2)$$

Первое получено в результате исключения суммы $\lambda_{12} U_{x,xy} + C_{12} u_{x,xy}$ в силу соотношений (3.6) и (3.7). Второе является результатом упрощения $u_{x,xy} \ll u_{y,xx}$ за счёт малости производной $u_{x,xy}$. Решение этих уравнений позволит решить проблему в целом, поскольку знание функции $U_x(x, y, t)$, $u_x(x, y, t)$, $U_y(x, y, t)$, $u_y(x, y, t)$ даёт возможность завершить всю задачу интегрирования уравнений.

Действительно, оставшееся уравнение (3.14) будет пополнено знанием неоднородных слагаемых $\lambda_{12} U_{x,xy} + C_{12} u_{x,xy}$ и после этого проблема интегрирования будет полностью завершена. Обращает на себя внимание физический смысл этого решения – функция $U_i(x, y, t)$ представляет недостающую акустическую волну.

Однако в общем виде уравнения (4.1), (4.2) слишком сложны для анализа. Интерес представляют некоторые частные решения, которые учитывают особенности распространения быстрых волн мартенситных превращений с постоянными сверхзвуковыми скоростями. Существенно, что при этом не успевают развиваться осложняющие диффузионные эффекты, влияющие на затухание волн. В этом случае можно ограничиться рассмотрением стационарных динамических решений – «задач без начальных условий». Можно ввести для их описания линейные анзацы:

$$q = x - V_q t, \quad r = y - V_r t. \quad (4.3)$$

Тогда в уравнениях (4.1), (4.2) динамические члены $\rho \ddot{U}_y$ и $\mu \ddot{u}_y$ выражаются специальным образом через пространственные производные

$$\rho \ddot{U}_y \rightarrow U_{y,qq} + U_{y,rr} + \dots \quad (4.4) \quad \rho \ddot{u}_y \rightarrow u_{y,qq} + u_{y,rr}. \quad (4.5)$$

Использование этих упрощающих соотношений дает возможность получить вместо (4.1), (4.2) более простую систему уравнений. Так, используя (4.5) в (4.2) получим уравнение синус-Гордона

$$\bar{k}_3 (1 - V^2 / V_q^2) u_{y,qq} + (1 - V^2 / V_r^2) u_{y,rr} = p_2 \sin u_y. \quad (4.6)$$

Что касается уравнения (4.1), оно принимает вид линейного неоднородного уравнения

$$\lambda (1 - V^2 / V_{s1}^2) U_{y,qq} + (1 - V^2 / V_{r2}^2) U_{y,rr} = c_1 u_{y,qq} + c_2 u_{y,rr} + A(y). \quad (4.7)$$

Решение этого линейного неоднородного уравнения имеет вид суммы

$$U_y = \lambda_2 U_y^0 + \Lambda u_y + A_1 q^2 + A_2 r^2. \quad (4.8)$$

Здесь U_y^0 – решение линейного однородного уравнения второго порядка

$$\lambda (1 - V^2 / V_{s1}^2) U_{y,qq}^0 + (1 - V^2 / V_{r2}^2) U_{y,rr}^0 = 0. \quad (4.9)$$

Оно описывает гармоническую волну, которая возбуждается микроскопическим источником – второе и третье слагаемое в уравнении (4.8). Они порождены микросмещениями, которые определяются уравнением (4.2) и представляет собой поле микросмещений, порожденное мартенситными превращениями непосредственно.

Для анализа этих последних, что является основной задачей статьи, необходимо решать уравнение (4.2). В этой статье ограничимся поиском решений типа волн, распространяющихся с постоянной скоростью, что мы уже начали использовать в этом параграфе. Тогда уравнение (4.2) примет вид

$$\bar{k}_3 (1 - V^2 / V_q^2) u_{y,qq} + (1 - V^2 / V_r^2) u_{y,rr} = p_2 \sin u_y. \quad (4.10)$$

Решение уравнения (4.7) позволяет найти величину микросмещений как функцию анзацев $q = x - V t$, $r = y - V t$. Это позволит выявить важные особенности процесса аустенитно-мартенситного превращения, распространяющегося с постоянной скоростью V . Рассмотрим особенности динамики аустенитно-мартенситного перехода в некоторых частных случаях.

На следующих рисунках представлено распределение частиц, в соответствии с решением уравнения (4.10) при различных значениях его параметров \bar{k}_3 , K_1 , K_2 .

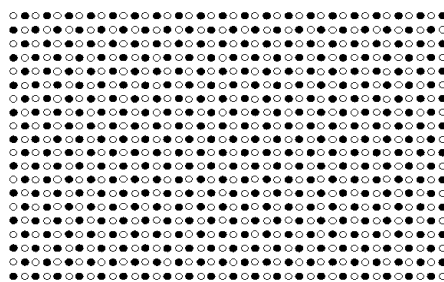


Рис. 2. Исходное (недеформированное) распределение частиц в образце, отвечающее однородной аустенитной фазе (\bar{k}_3 , K_1 , $K_2=0$).

Далее, на рисунках показана картина распределения и перераспределения атомов в плоскости подложки (XY). Подавляющее их количество, занимающее широкие зоны (полосы) представляют по-прежнему участки аустенитной фазы, разделённые узкими прослойками вновь образующейся мартенситной.

Опишем наблюдаемую картину подробнее. На каждой паре рисунков представлено распределение атомов в фиксированный момент времени. Слева показана оксанометрическая картина распределения частиц в пространстве. Справа дана их проекция на плоскость XY (как на Рис. 2), на которую все частицы спроектированы в данный момент времени.

Ниже представлены графические изображения четырёх различных решений, выбранных в различные моменты времени при различных значениях пары параметров типа пространственной частоты для различных решений. Они характеризуют микросмещения $u_x(x,y,t)$, $u_y(x,y,t)$.

Мы рассматриваем случай плосконапряженного состояния, когда z -компонента микросмещения является произвольной константой задачи при отличных от нуля градиентах функций микросмещений $u_x(x,y,t)$, $u_y(x,y,t)$. Поэтому на последующих рисунках, кроме двумерных распределений микросмещений (правые рисунки), приведены и оксанометрические трехмерные картинки, разумеется, неизменные вдоль оси OZ.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Cn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) / \operatorname{Dn}(c_2 y, \sqrt{v_2}) / \operatorname{Sn}(c_1 x, \sqrt{v_1}), \quad v_1 = 0,99; v_2 = 10^{-7}.$$

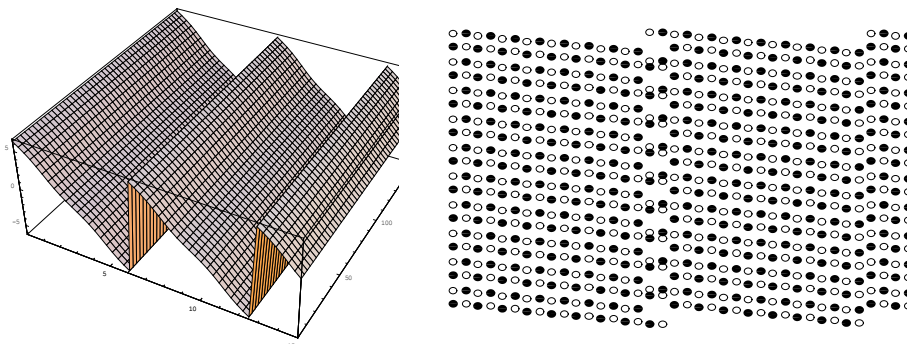


Рис. 3. Квазиодномерное решение, описывающее начало процесса мартенситного превращения. Видны узкие мартенситные пластины (в двумерной модели - полосы), прорезающие аустенитную матрицу.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Dn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) \operatorname{Sn}(c_2 y, \sqrt{v_2}), \quad v_1 = 0.9999999; v_2 = 0.0001$$

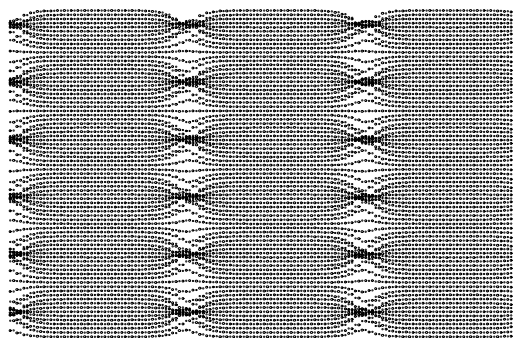
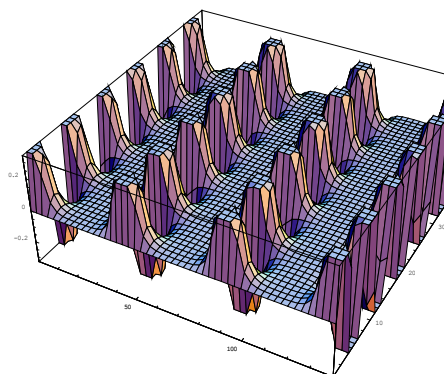


Рис. 4. Стержнеобразные мартенситные области, образующие квазиодномерную периодическую сверхструктуру.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Dn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) \operatorname{Sn}(c_2 y, \sqrt{v_2}), \quad v_1 = 0.9999; v_2 = 0.9999$$

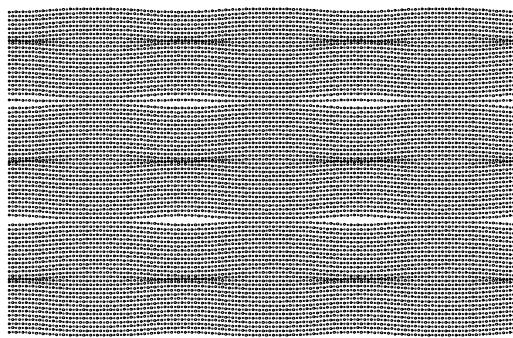
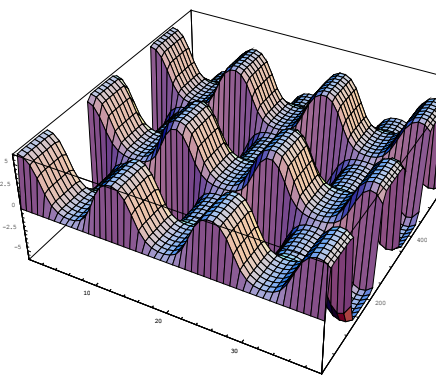


Рис. 5. Двумерная периодическая сверхструктура трещин, возникающая на границах мартенсит-аустенит.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Dn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) \operatorname{Dn}(c_2 y, \sqrt{v_2}), \quad v_1 = 0.999999999999; v_2 = 0.95$$

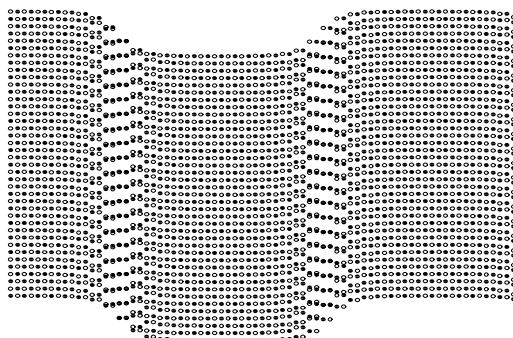
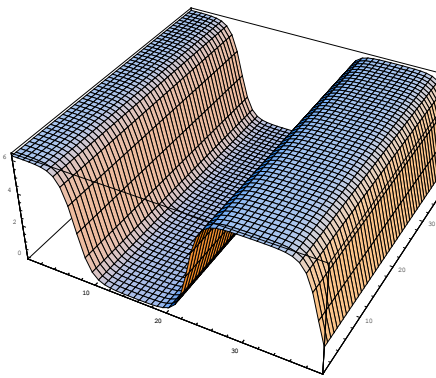


Рис. 6. Квазиодномерная микроструктура, с образованием узких мартенситных прослоек, отвечающих чередующимся разным мартенситным вариантам.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Dn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) \operatorname{Dn}(c_2 y, \sqrt{v_2}) , \quad v_1 = 0.999999; v_2 = 0.95$$

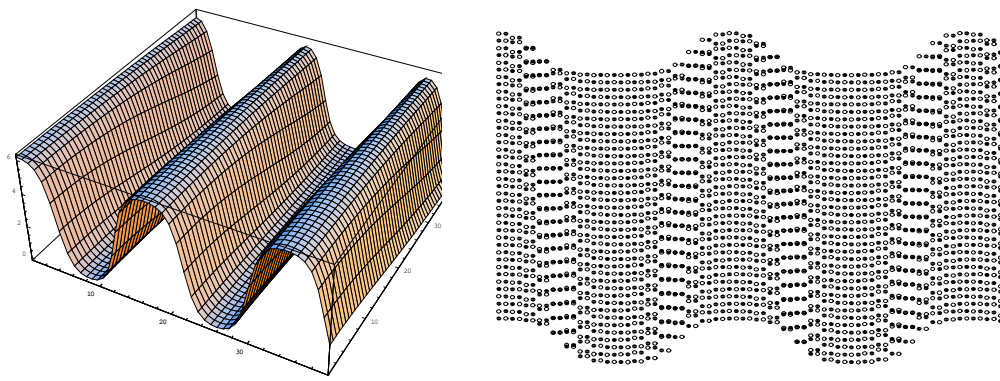


Рис. 7. Мартенситные прослойки разных вариантов с чередующимся наклоном.

$$\operatorname{tg} \frac{u_y}{4} = A \operatorname{Dn}(c_1 x, \sqrt{v_1}) \operatorname{Dn}(c_2 y, \sqrt{v_2}) , \quad v_1 = 0.9997; v_2 = 0.95$$

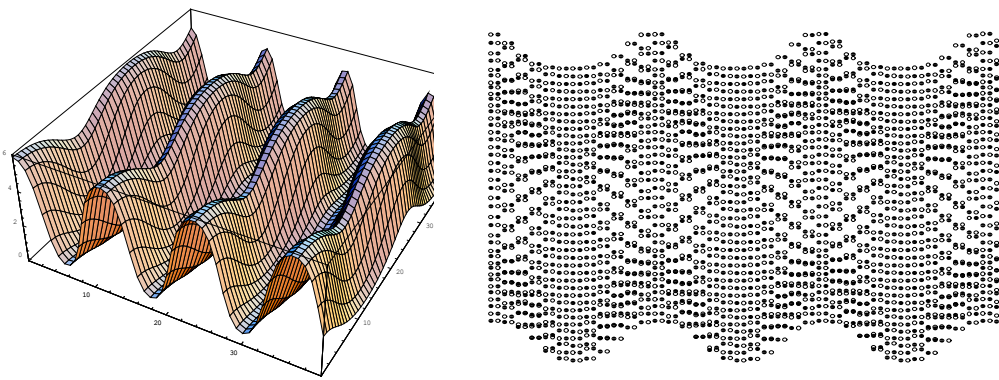


Рис. 8. Аустенитные прослойки, остающиеся ближе к завершению мартенситного превращения.

5. Выводы

В заключение мы хотим отметить, что имеющиеся в литературе попытки построить теорию МФП не привели к созданию математической модели, анализ которой позволил бы описать количественно совокупность эффектов, характерных для таких переходов. Наш подход основан на таких фундаментальных свойствах, как существование трансляционной симметрии при относительности смещения подрешеток и наличии взаимодействия, билинейного по полю деформаций и градиентам смещения подрешеток. Соответствующая математическая модель приводит к системе уравнений, состоящей из уравнения типа синус-Гордона, дополненного уравнением нелинейной теории упругости. Мы показали, что такая система уравнений обладает набором решений, описывающих как статические несоизмеримые структуры, типичные для дифракционных картин рассеяния в области МФП, так и процесс прорастания с постоянной скоростью мартенситных пластин в аустенитной матрице.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 13-01-00224-а и №13-02-91332-ННИО_а.

Литература

- [1] Э.Л. Аэро // *Физика твердого тела* **42** (2000) 1113.
- [2] Э.Л. Аэро // *Успехи механики* **1** (2002) 130.

- [3] Э.Л. Аэро // *Физика твердого тела* **45** (2003) 1482.
- [4] V.P. Dmitriev, S.B. Rochal, Yu.M. Gufan, P. Toledano // *Physical Review Letters* **60** (1988) 1958.
- [5] М. Борн, Хуан Кунь, *Динамическая теория кристаллических решеток* (И.Л., Москва, 1958).
- [6] C.M. Wayman, In: *Martensitic transformations*, ed. by B.C. Muddle (Aedemannsdorf: Trans. Tech., 1990).
- [7] G.B. Olson, A.L. Roitburd, In: *Martensites*, ed. by G.B. Olson and W.S. Owen (Metals Park, Ohio: American Society for Metals, 1992).
- [8] P. Toledano, G. Krenner, M. Prem, H.-P. Weber, V.P. Dmitriev // *Physical Review B* **64** (2001) 144104.
- [9] Y. Wang, A. G. Khachaturyan // *Acta Materialia* **45** (1997) 759.
- [10] S.L. Sass // *Journal of the Less Common Metals* **28** (1972) 157.
- [11] W. Lin, H. Spalt, B.W. Batterman // *Physical Review B* **13** (1976) 5158.
- [12] C.M. Hwang, M. Meichle, M.B. Salamon, C.M. Wayman // *Acta Materialia* **47** (1983) 9.
- [13] S. Sreekala, R. Ahluwalia, G. Ananthakrishna // *Physical Review B* **79** (2004) 224105.
- [14] А.Л. Корженевский, Э.Л. Аэро, А.Н. Булыгин // *Известия РАН. Серия физическая* **69** (2005) 1271.
- [15] А.Л. Корженевский, Э.Л. Аэро, В сборнике: *Проблемы машиноведения: точность, трение и износ, надежность, перспективные технологии*, под ред. В.П. Булатова (Наука, СПб, 2005), с. 561.
- [16] J.W. Christian, G. B. Olson, M. Cohen // *Journal de Physique IV France* **5** (1995) C8-3.
- [17] A.D. Bruce, R.A. Cowley, *Structural Phase Transitions* (Taylor and Fransis, London, 1981).
- [18] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Статистическая физика* (Наука, Москва, 1976).
- [19] Э.Л. Аэро, А.Л. Корженевский // *Физика и Механика Материалов* **21** (2014) 58.

DYNAMIC THEORY OF COEXISTING AUSTENITE-MARTENSITE PHASE FORMATION

E.L. Aero^{*}, A.L. Korzhenevskii, A.N. Bulygin

Institute of Problems of Mechanical Engineering, Russian Academy of Sciences,
Bolshoj 61, Vasilievskii Ostrov, St. Petersburg, 199178, Russia

*e-mail: 16aero@mail.ru

Abstract. A two-dimensional nonlinear lattice model of austenite-martensite transformation is considered. The model Hamiltonian contains a periodic term and gradient ones. The mixed gradient terms are included to account for the coupling of internal structural degrees of freedom of the complex lattice with the conventional acoustic displacements. The exact solutions that describe constant velocity growth and morphology of the coexisting incommensurate austenite-martensite structures are obtained. In particular, the results explain the appearance so called “premartensitic” superlattice reflections that are typically observed near the transformations.

Acknowledgements

This work was supported by grants of RFBR № 13-01-00224-a and №13-02-91332-NNIO_a.

References

- [1] E.L. Aero // *Physics of the Solid State* **42** (2000) 1113.
- [2] E.L. Aero // *Advances in Mechanics* **1(3)** (2002) 130 (in Russian).
- [3] E.L. Aero // *Physics of the Solid State* **45** (2003) 1482.
- [4] V.P. Dmitriev, S.B. Rochal, Yu.M. Gufan, P. Toledano // *Physical Review Letters* **60** (1988) 1958.
- [5] M. Born, K. Huang, *Dynamical theory of crystal lattices* (Clarendon Press, Oxford, 1954).
- [6] C.M. Wayman, In: *Martensitic transformations*, ed. by B.C. Muddle (Aedemannsdorf: Trans. Tech., 1990).
- [7] G.B. Olson, A.L. Roitburd, In: *Martensites*, ed. by G.B. Olson and W.S. Owen (American Society for Metals, Metals Park, Ohio, 1992).
- [8] P. Toledano, G. Krexner, M. Prem, H.-P. Weber, V.P. Dmitriev // *Physical Review B* **64** (2001) 144104.
- [9] Y. Wang, A. G. Khachaturyan // *Acta Materialia* **45** (1997) 759.
- [10] S.L. Sass // *Journal of the Less Common Metals* **28** (1972) 157.
- [11] W. Lin, H. Spalt, B.W. Batterman // *Physical Review B* **13** (1976) 5158.
- [12] C.M. Hwang, M. Meichle, M.B. Salamon, C.M. Wayman // *Acta Materialia* **47** (1983) 9.
- [13] S. Sreekala, R. Ahluwalia, G. Ananthakrishna // *Physical Review B* **79** (2004) 224105.
- [14] A.L. Korzhenevskii, E.L. Aero, A.N. Bulygin // *Izvestiya RAN. Seriya fizicheskaya* **69** (2005) 1271.
- [15] A.L. Korzhenevskii, E.L. Aero, In: *Problems of mechanical engineering: exactness, friction, wear, safety, perspective technology*, ed. by V.P. Bulatov (Saint-Petersburg, Nauka, 2005), c. 561.
- [16] J.W. Christian, G.B. Olson, M. Cohen // *Journal de Physique IV France* **5** (1995) C8-3.
- [17] A.D. Bruce, R.A. Cowley, *Structural Phase Transitions* (Taylor and Fransis, London, 1981).
- [18] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, New-York 1969).
- [19] E.L. Aero, A.L. Korzhenevskii // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 58.